

OTKA témapályázat zárójelentése

# Elektron-elektron kölcsönhatás szilárdtestekben DFG-IRTG

Tudományterület: **Szilárdtestfizika**

OTKA nyilvántartási szám: **NI 70594**

Témavezető: **Virosztek Attila**, a fizikai tudomány doktora

Kutatóhely: **BME, Fizika Tanszék**

A kutatás időtartama: **2007-2008**

Az OTKA támogatás összege: **15 MFt**

## Tartalomjegyzék

<b>1. A pályázat célja</b>	<b>2</b>
<b>2. Az elért eredmények</b>	<b>3</b>
2.1. Nemkonvencionális sűrűség hullámok . . . . .	3
2.2. Kvantum fázisátalakulások erősen korrelált rendszerekben . . .	4
2.3. Elektron spin rezonancia szilárdtestekben . . . . .	6
2.4. Mágneses momentumok frusztrált rácsokon . . . . .	7
<b>3. Kiegészítő információk</b>	<b>8</b>

# 1. A pályázat célja

Az OTKA támogatás célja a Budapest-Marburg nemzetközi doktori (PhD) iskola (Európai Graduális Kollégium, újabb nevén IRTG, azaz International Research Training Group) magyar oldalán felmerülő költségek részbeni finanszírozása volt. A marburgi (Németország) Philipps Egyetem Fizika Tanszéke és a BME Fizikai Intézete, valamint az MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézete vezető kutatói részvételével működtetett közös doktori iskolát német oldalról a DFG támogatja 2011-ig. A magyar oldalt az OTKA 2003-2006 között az NDF 45172 számú pályázat keretében támogatta, melynek zárójelentését maximális pontszámmal "kiváló"-ra értékelte. A jelen pályázat ennek a támogatásnak volt a közvetlen folytatása. Megjegyezzük, hogy a Budapest-Marburg IRTG magyar oldala a 2009-2011-es időszakra is elnyerte az OTKA támogatását, így az NN 76727 számú pályázat segítségével a nemzetközi doktori iskola működése a teljes németországi futamidőre biztosított. Az iskola kutatási területeiről, a két oldal közös programjairól, valamint a résztvevő hallgatókról és témavezetőkről részletes információk találhatóak az iskola honlapján:

<http://www.physik.uni-marburg.de/de/forschung/forschungseinrichtungen/electron-electron-interactions-in-solids/home.html>.

Az OTKA támogatást a közös doktori iskola két magyar PhD hallgatójának ösztöndíjára fordítottuk a futamidő alatt. A hallgatók személye évről évre változott, így a jelen beszámoló az aktuális hallgatóknak megfelelően az iskola négy kutatási területét érinti (zárójelben a kutatást végző PhD hallgató neve, és az ösztöndíjjal támogatott kutatás tanéve):

- Nemkonvencionális sűrűség hullámok  
(Ványolos András, 2006/2007),
- Kvantum fázisátalakulások erősen korrelált rendszerekben  
(Rapp Ákos, 2007/2008),
- Elektron spin rezonancia szilárdtestekben  
(Nagy Kálmán, 2008/2009),
- Mágneses momentumok frusztrált rácsokon  
(Romhányi Judit, 2006/2009),

Támogatott hallgatóink közül PhD fokozatot szerzett Ványolos András 2007-ben és Rapp Ákos 2008-ban, mindketten "summa cum laude" minősítéssel.

Nagy Kálmán PhD védése 2009 folyamán várható, Romhányi Judit pedig jelenleg harmadéves PhD hallgató. A továbbiakban a kutatási eredményeket a fenti témák szerint csoportosítva ismertetjük a futamidő (2007-2008) alatt megjelent publikációk alapján. A szövegben megadott referenciák a publikációs lista megfelelő elemeire vonatkoznak.

## 2. Az elért eredmények

### 2.1. Nemkonvencionális sűrűség hullámok

Az elmúlt évtized során nagy érdeklődés övezte a nemkonvencionális, azaz hullámszámfüggő rendparaméterrel jellemezhető sűrűség hullámok témakörét. Ilyen fázis valószínűsíthető többek között a magashőmérsékletű szupravezetők aluldópolt tartományában. A munka során célul tűztük ki, hogy a nemkonvencionális sűrűség hullám fázis korábban általunk kidolgozott elméleti alapjaira építve több kísérleti érdeklődésre is számot tartó fizikai mennyiséget meghatározzunk, és jóslatainkat minél több anyag esetében összevessük az elérhető mérési eredményekkel.

Megvizsgáltuk a nemmágneses szennyezők által okozott szórás hatását kvázi-egydimenziós nemkonvencionális töltés- és spinsűrűség hullámban tetszőleges erősségű szórópotenciál esetén az ún. nemkeresztező közelítésben (NCA). Számításaink lehetőséget teremtettek arra, hogy a már jól ismert másodrendű Born, és a unitary határesetek között is kiszámítsuk a kondenzátum termodinamikai és frekvenciafüggő jellemzőit [6]. Tanulmányoztuk továbbá egy nemmágneses szennyező környezetében kialakuló lokális állapotűrűséget és a Friedel-oszcillációkat is. A nemkonvencionális kondenzátumban meglévő kisenergiás elektron-lyuk gerjesztések miatt a kötött állapotok véges szélességűek (élettartamúak), így könnyen azonosíthatóak pásztázó alagút-mikroszkóppal (STM) végzett mérések során. Hasonló okokból a Friedel-oszcillációk lassan csengenek le, így várhatóan szintén könnyebben mérhetők [4].

Kidolgoztuk az elektron-fonon kölcsönhatás következtében kialakuló nemkonvencionális sűrűség hullámok elméletét, és meghatároztuk a rendszer frekvenciafüggő vezetőképességét. Az ebből származtatható effektív tömeg a hőmérséklet nem monoton függvénye, ellentétben a konvencionális esettel [5]. Megvizsgáltuk makroszkópikus számú mágneses szennyező hatását egy kétdimenziós  $d$ -típusú spinsűrűség hullámban. Megállapítottuk, hogy a szennyező

koncentráció növelésével a rendparaméter eleinte növekszik, így értelmezhetővé vált a pseudogap energiaskála megnövekedése nikkkel szennyezők hatására egy magashőmérsékletű szupravezető anyagban [7,8]. Áttekintést adtunk a nemkonvencionális sűrűség hullámok relevanciájáról a magashőmérsékletű és a nehézfermion szupravezetők pseudogap fázisával összefüggésben. Megmutattuk, hogy az YBCO, LSCO, Bi2212 és CeCoIn<sub>5</sub> vegyületek pseudogap fázisában az utóbbi néhány évben kísérletileg megfigyelt óriás Nernst effektus és a szögfüggő mágneses ellenállás is rendkívül jól reprodukálható elméletileg, amennyiben a pseudogap fázist egy  $d$ -típusú sűrűség hullámmal azonosítjuk [9].

Ennek az alfejezetnek a zárásaként megemlíjtjük, hogy a nemkonvencionális sűrűség hullámok témakörében írt doktori disszertációját Ványolos András 2007-ben "summa cum laude" minősítéssel védte meg, és azt a következő évben a saarbrückeni VDM Verlag kiadó könyv formában is kiadta [3]. Ezen túlmenően kidolgozott egy olyan új numerikus módszert, amelyben a  $d$ -dimenziós Laplace operátor sajátérték egyenlete köbös rácson  $h^6$  nagyságrendű hibával oldható meg, ahol  $h$  a rács finomságát jellemző rácsállandó. Ez a módszer a numerikus matematikában és a fizikában is rendkívül hasznos lehet, hiszen a Laplace operátor a Schrödinger-egyenlettől kezdve a klasszikus hullámeqyenleten át nagyon sok parciális differenciálegyenletben szerepel, amiket az irodalomban jellemzően a szokásos  $h^2$  rendű megoldásémával kezelnek [12].

## 2.2. Kvantum fázisátalakulások erősen korrelált rendszerekben

Ebben az alfejezetben két összefüggő, de jól elkülöníthető témakörben végzett kutatásainkról számolunk be. Vizsgáltuk olyan egydimenziós rendszerek dinamikus korrelációit véges hőmérsékleteken, ahol az elemi gerjesztések egy energiárésen keresztül történnek. Ez a spektrumban található energiárés jelenti a legfőbb elméleti akadályt a véges hőmérsékletű korrelációs függvény meghatározásában. Igen fontos kísérleti motiváció, hogy az antiferromágneses Heisenberg-modell dinamikus korrelációs függvényének Fourier-transzformáltja ma már igen pontosan mérhető rugalmatlan neutron szórás segítségével az úgynevezett Haldane-anyagokban. Sachdev és Young nyomán [Phys. Rev. Lett. **78**, 2220 (1997)] kellően alacsony hőmérsékleten szemi-klasszikus közelítésben azonban sikerült analitikus formában meghatározni

a korrelációs függvényt és annak a véges hőmérsékleten lényeges relaxációs részét. A korábban általunk a kvantum Potts-modellre [Phys. Rev. B **74**, 014433 (2006)] már alkalmazott módszer minden olyan egy dimenziós rendszerben működik, ahol az energiarésen keresztül gerjesztett kvázirészecskék szórási mátrixa a hosszú hullámhosszú limeszben kicserélődési alakot vesz fel. Mivel a modellekre vonatkozó fenti feltételek meglehetősen általánosak, [13]-ban arra a következtetésre jutottunk, hogy az általunk vizsgált rendszerekben: a kvantum Potts-modellben, az  $O(N)$  szimmetriájú rotor modellekben (és így az  $S=1$  antiferromágneses Heisenberg-lánokban a  $Q \approx \pi/a$  hullámszám környékén) ugyanaz az univerzális relaxációs függvény befolyásolja a korrelációk lecsengését. Ezt az alakot kapta Damle és Sachdev a sine-Gordon modell esetében is [ Phys. Rev. Lett. **95**, 187201 (2005) ], melyet tőlük kissé eltérő levezetéssel szintén előállítottunk. Bizonyos esetektől eltekintve (például a transzverzális térbeli Ising-modell esetén, ahol a gerjesztéseknek nincs belső kvantumszáma) a fent említett univerzális relaxációs függvény hosszú időkülönbségek esetén diffúzív alakot ölt.

Számos kutatócsoport végez a világon kísérleteket olyan, többnyire alkáli atomokból álló rendszereken, ahol a gázt a kvantum degenerált tartományba hűtik valamilyen mágneses vagy optikai csapdában. Megfelelő hullámhosszú lézerekkel rácsok is létrehozhatók. Ezzel olyan rendszer jön létre, amiben a paraméterek kísérletileg rugalmasan változtathatók, továbbá belátható, hogy a rendszer viselkedése alacsony hőmérsékleteken a szilárdtestfizikában kiemelkedő fontosságú Hubbard-moddal írható le. Konkrétan egy olyan modellt vizsgáltunk, ami három különböző hiperfinom állapottal jellemezhető fermionikus atomokból áll, és az atomok közötti lokális kölcsönhatás effektív vonzó jellegű. Feltéve, hogy a különböző hiperfinom állapotok között egyenlő a kölcsönhatás erőssége, a rendszer globális  $SU(3)$  szimmetriával rendelkezik. A Honerkamp és Hofstetter [Phys. Rev. B **70**, 094521 (2004)] által vizsgált gyenge csatolású határesetben az alapállapotban ez a szimmetria sérül, és szuperfolyékony állapot jön létre. Az erős csatolású határesetben viszont szinglett kötött atomhármások, ún. trionok alakulnak ki, amik megőrzik az  $SU(3)$  szimmetriát. Ez a kvantum fázisátalakulás analógiát mutat a kvantum színdinamikában vizsgált szín-szuperfolyadék - barion átalakulással. Ezt az átalakulást vizsgáltuk végtelen dimenzióban egy speciális Gutzwiller-féle hullámfüggvénnyel, mely a határesetekben az említett alapállapotok alakját veszi fel. A végtelen dimenziós határesetben a Gutzwiller várható értékeket egzakt módon meg tudtuk határozni a dinamikus átlagtér-elmélet egy módszerének alkalmazásával [2]. A kísérletekben a hiperfinom állapotok közötti

csatolás általában anizotróp, ezért módosítottuk a számítást arra az esetre is, amikor a kölcsönhatás erőssége a hiperfinom állapotok között különböző. A szuperfolyadék-trion átalakulást ebben az esetben is megfigyeltük [11].

Megjegyezzük, hogy a fenti eredményeken alapuló doktori disszertációját [10] Rapp Ákos 2008-ban "summa cum laude" minősítéssel megvédte, valamint hogy a trion-szuperfolyadék fázisátalakulás tárgyalásával foglalkozó munkáját a Nature Physics folyóiratban 2007-ben a Nobel díjas Frank Wilczek méltatta.

### 2.3. Elektron spin rezonancia szilárdtestekben

A BME Fizikai Intézetében rendelkezésünkre álló különleges érzékenységgű elektron spin rezonancia (ESR) berendezés többféle anyagcsalád változatos fizikai tulajdonságainak vizsgálatát teszi lehetővé. A több mint két évtize nagy érdeklődéssel övezett magashőmérsékletű szupravezető ötvözetek közül tanulmányoztuk az  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$  erősen aluldópolt antiferromágneses anyagot. Arra kerestünk választ, hogy csekély lyuk koncentráció esetén kimutatható-e térbeli inhomogenitás a mágneses és elektromos tulajdonságokban. Megállapítottuk, hogy az antiferromágneses polarizáció a lyuksűrűség statikus modulációjához kötött, és négyforgású szimmetriával rendelkezik, azaz a lyukak nem az ún. stripe alakzatot veszik fel [1].

Felújított spektrométerünk jelentősen megnövekedett érzékenysége lehetővé tette, hogy biofizikai mérésekkel próbálkozzunk. A Szegedi Biológiai Kutatóintézetből Páli Tibor csoportjával merült fel együttműködés lehetősége. Szegeden nagy hagyománya van biológiai membránok fizikai vizsgálatának főleg X-sávú ESR segítségével. Nagyterű méréseink jól kiegészíthetik az X-sávú eredményeket. A vizes oldatok vizsgálatára egy Fabry-Perot rezonátort építettünk és kifejlesztettünk egy speciális mintatartót. A vizes mintát nagy dielektromos vesztesége miatt az elektromos tér csomóhelye körül vékony rétegben kell elhelyezni. A végső kialakításban a mintaréteg vastagsága  $30 \mu\text{m}$  körüli. Tesztmérésekben sikerült megmutatni, hogy konstrukciónkkal a vizsgálni kívánt mintáknak megfelelő érzékenység érhető el.

Az  $\text{ET}_2\text{MnCu}[\text{N}(\text{CN}_2)]_4$  mágneses töltésátviteli sön készültek már korábban ESR mérések laborunkban illetve Lausanne-ban. Ezek feldolgozása során újabb kérdések merültek fel, melyek tisztázására további vizsgálatokat végeztünk mind saját laborunkban mind pedig Lausanne-ban az EPFL nagyterű ESR laborjában. Sikerült magyarázatot találni az ESR mérésekben megfigyelt nagy anizotróp eltolódásokra, melyek a statikus mérésekben

nem jelentkeznek. Modellszámítások segítségével meghatároztuk a rétegesen elhelyezkedő mangán ionok környezetének torzulásából származó kristályte-  
reket illetve az ionok között fellépő kicserélődés nagyságát. Nagyfrekvenciás  
mérésekben a vonal nem lineáris frekvenciafüggő eltolódását figyeltük meg.  
Kimutattuk, hogy ezt a jelenséget az anion és a kation párosítatlan elektron-  
jai közötti rendkívül kicsi átfedés okozza. Alacsony frekvenciákon a két spin  
rendszer csatolt rezonanciáját figyeljük meg, míg nagy frekvencián teljesen  
fel tudjuk bontani a két vonalat. Ezek alapján kijelenthető, hogy a vizsgált  
anyag anionjának háromdimenziós polimer szerkezete ellenére, az elektroni-  
kus viselkedése erősen kétdimenziós.

## 2.4. Mágneses momentumok frusztrált rácsokon

A mágneses rendeződés modelljei, mint pl. a Heisenberg modell, a leghét-  
köznapiabb (pl. köbös) rácsokon antiferromágneses csatolás esetén tipikusan  
a Neél állapothoz hasonló alapállapotra vezetnek. Amennyiben ez a hosszú-  
távú mágneses korrelációkkal rendelkező állapot instabillá válik, pl. a vizsgált  
rendszer dimenziójának csökkenésével, akkor olyan egzotikus alapállapotok  
megjelenésére is számíthatunk, mint pl. az RVB (resonating valence bond)  
állapot. Ezek előfordulásának valószínűségét jelentősen növeli, ha a szóban  
forgó rács frusztrált, mint pl. a háromszögrács.

Az  $S = 1/2$  háromszögrácson újonnan talált egzotikus fázisok teljesebb  
megértésének érdekében elvégeztük a háromszögön lehetséges rendparamé-  
terek szisztematikus tanulmányozását. Meghatároztuk a lehetséges 63 rend-  
paramétert, majd osztályoztuk azokat a háromszögrács geometriai, és a spi-  
nek forgatási szimmetriája szerint. Célunk egy egyszerű átlagtér Hamilton  
operátor felírása volt, mely ezeket a rendparamétereket használva alkalmas  
egzotikus, például nematikus és triatikus fázisok feltérképezésére, valamint  
összehasonlítottuk ezt a modellt és a plakett kicserélődéssel kibővített Hei-  
senberg modellt.

Az erősen frusztrált mágneses rendszerek egy példaként megvizsgáltuk a  
kooperatív paramágnes  $Tb_2Ti_2O_7$  alacsony energiás modelljét. A  $Tb_2Ti_2O_7$ -  
ben a mágneses ritka földfém  $Tb^{3+}$  ionok geometriailag frusztrált piroklór  
rácsot alkotnak. A  $4f$  elektronok erős spin-pálya csatolásának köszönhetően  
jelentős mágneses anizotrópia van jelen, így a  $Tb^{3+}$  ionok szabadsági fokai-  
ra tekinthetünk úgy, mint az Ising spinekéire. Neutronszerelési kísérletek azt  
mutatják, hogy közvetlenül az alapállapot dublett fölött egy másik dublett  
helyezkedik el. Ez alapján felírtunk egy olyan effektív Hamilton operátort,

amely figyelembe veszi a  $Tb^{3+}$  ionok legalacsonyabban fekvő és első gerjesztett dublett állapotait. Első lépésként rácshelyre faktorizált variációs hullámfüggvény módszert használva felrajzoltuk az effekív modellünk fázisdiagramját. A csatolási paraméterek függvényében találtunk rendezett "gap"-es, és "gap" nélküli rendezetlen fázisokat. Következő lépésben a rácsot mágneses térbe helyeztük és elkészítettük a fázisdiagramot két különböző irányban alkalmazott külső tér esetében is.

### 3. Kiegészítő információk

A jelen beszámoló tárgyául szolgáló témák alap kutatás jellegűek, eredményeik elsősorban referált nemzetközi folyóiratokban megjelent publikációkban testesülnek meg. Ezen 13 publikáció között szerepel egy Phys. Rev. Lett., négy Phys. Rev. B, egy New J. Phys., egy J. Comp. Phys., és egy Eur. Phys. J. B cikk, így a publikációk össz. impakt faktora 31.

Budapest, 2009. február 27.

Virosztek Attila